

Simulació numèrica mesoscalar de l'ozó troposfèric a Catalunya

Sara Ortega Jiménez

ADVERTIMENT. La consulta d'aquesta tesi queda condicionada a l'acceptació de les següents condicions d'ús: La difusió d'aquesta tesi per mitjà del servei TDX (www.tesisenxarxa.net) ha estat autoritzada pels titulars dels drets de propietat intel·lectual únicament per a usos privats emmarcats en activitats d'investigació i docència. No s'autoritza la seva reproducció amb finalitats de lucre ni la seva difusió i posada a disposició des d'un lloc aliè al servei TDX. No s'autoritza la presentació del seu contingut en una finestra o marc aliè a TDX (framing). Aquesta reserva de drets afecta tant al resum de presentació de la tesi com als seus continguts. En la utilització o cita de parts de la tesi és obligat indicar el nom de la persona autora.

ADVERTENCIA. La consulta de esta tesis queda condicionada a la aceptación de las siguientes condiciones de uso: La difusión de esta tesis por medio del servicio TDR (www.tesisenred.net) ha sido autorizada por los titulares de los derechos de propiedad intelectual únicamente para usos privados enmarcados en actividades de investigación y docencia. No se autoriza su reproducción con finalidades de lucro ni su difusión y puesta a disposición desde un sitio ajeno al servicio TDR. No se autoriza la presentación de su contenido en una ventana o marco ajeno a TDR (framing). Esta reserva de derechos afecta tanto al resumen de presentación de la tesis como a sus contenidos. En la utilización o cita de partes de la tesis es obligado indicar el nombre de la persona autora.

WARNING. On having consulted this thesis you're accepting the following use conditions: Spreading this thesis by the TDX (www.tesisenxarxa.net) service has been authorized by the titular of the intellectual property rights only for private uses placed in investigation and teaching activities. Reproduction with lucrative aims is not authorized neither its spreading and availability from a site foreign to the TDX service. Introducing its content in a window or frame foreign to the TDX service is not authorized (framing). This rights affect to the presentation summary of the thesis as well as to its contents. In the using or citation of parts of the thesis it's obliged to indicate the name of the author.

4. MNEQA: estructura del programa i resultats

4.1. Introducció

El model d'emissions MNEQA ha estat dissenyat per ser un model operatiu integrat en un model de qualitat de l'aire. L'objectiu fou crear un sistema capaç de fer simulacions, i en el futur previsions, d'ozó, òxids de nitrogen i matèria particulada per Catalunya. No obstant, el model podria ser exportat a una altra regió sempre i quan els fitxers base tinguessin l'estructura utilitzada pel programa. La base del càlcul de les emissions per cada sector d'interès s'ha exposat anteriorment i en aquí només es vol destacar l'estructura que s'ha seguit en el programa, la seva adaptabilitat a nous dominis o escenaris, la informació d'entrada i de sortida i els requisits d'execució.

El model d'emissions MNEQA consta d'una sèrie de programes informàtics creats amb fortran 90 i que s'executen a través de scripts. La dependència de les emissions en la temperatura o la radiació, en el tipus de dia (laborable o festiu), o en el mes de l'any fa que s'hagi d'executar el model d'emissions després d'haver executat el model meteorològic MM5 i en particular per cada dia de simulació. El programa està estructurat en mòduls independents entre sí per tal de que en sigui fàcil la modificació de les diferents parts.

La base de l'estructura que s'ha seguit ha estat condicionada per la informació variable i la informació estàtica. Les dades que no han de variar diàriament, sinó que són estacionals o anuals, només s'han de generar una vegada. Donat que l'objectiu és que MNEQA formi part d'un model operatiu, el temps de càlcul és un factor determinant. Per això els fitxers estàtics s'han generat mitjançant pre-processos per a cada domini, creant els fitxers base de cada mòdul i que així no han de ser generats a cada simulació.

Les dades o fitxers base estan adaptats als dominis de simulació. És per això que en cas de voler modificar els dominis caldria generar de nou els fitxers de dades que utilitza el model, però els programes continuarien essent vàlids. Cada domini es divideix en cel·les (quadrícules o caselles) que divideixen i cobreixen l'espai tancat pel domini. L'adaptació de les dades s'ha realitzat amb el sistema d'informació geogràfic MiraMon, que assigna, depenent de la localització geogràfica de les fonts, la casella corresponent al domini considerat. Els fitxers de dades que utilitza el programa es descriuen a la secció 4.3. d'aquest capítol.

A la Figura 4.1. es mostren les entrades o inputs que necessita el model. La descripció de la simulació consisteix en un fitxer amb la informació del període a simular, dies i hores. La sortida del model meteorològic és imprescindible per al càlcul d'aquelles emissions que tenen dependència en la temperatura, com poden ser les emissions biogèniques i les emissions evaporatives. La descripció del domini és necessària perquè els programes llegeixen aquesta informació com a input, per això els mateixos programes serveixen per dominis diferents, o el que és el mateix per qualsevol domini, sempre i quan tinguin la descripció del domini i la simulació meteorològica del domini. Els fitxers amb dades base, són els fitxers generats pels pre-processos, com per exemple el fitxer amb les emissions estàndards per al càlcul de les emissions biogèniques i que el mòdul biogènic corregirà de temperatura i radiació per cada hora.

ENTRADES (INPUTS)
(OUTPUTS)

PROCESSOS

SORTIDES

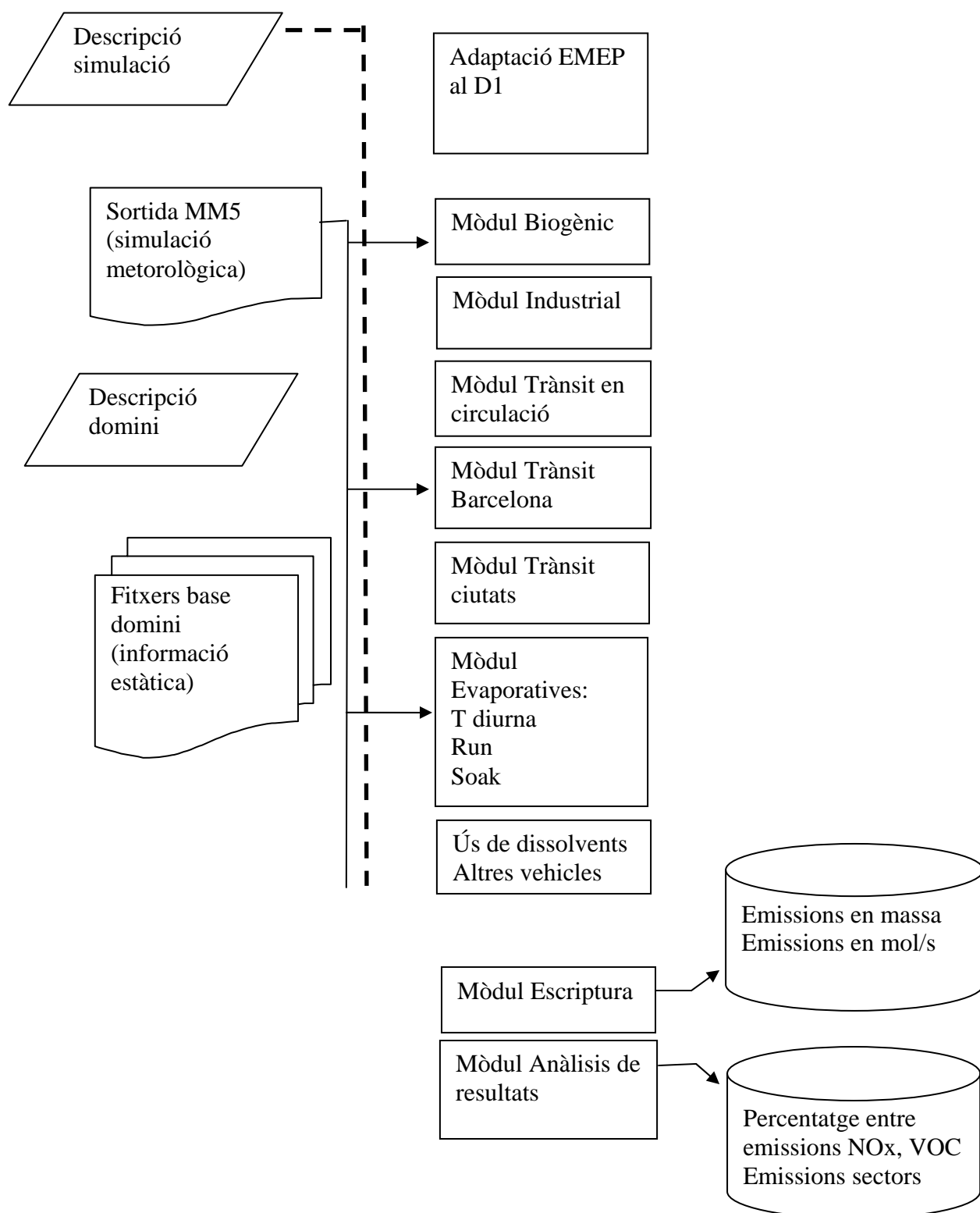


Figura 4.1. Diagrama de flux del model d'emissions MNEQA.

Les sortides o outputs són les del mòdul escriptura, amb les emissions en massa i molars per a les espècies del mecanisme CBM-IV que és el mecanisme pel qual s'han preparat les emissions. Del mòdul d'anàlisi es generen emissions en massa per a cada sector i percentatges de cada sector respecte les emissions totals. Per les emissions del trànsit també hi ha la sortida del percentatge de cada procés diferent, respecte el total del trànsit. Aquests percentatges es fan per NO_x i per VOCs perquè són els contaminants més rellevants en les emissions enfocades a l'estudi de l'ozó.

4.2. Estructura modular

El sistema té uns dominis prefixats (D1, D2, D3 i D4) de resolucions 27 km, 9 km, 3 km i 3 km, respectivament, descrits al final del capítol 2. Les dimensions dels dominis, l'àrea sobre la que s'estenen, marca el tractament que s'ha fet de les emissions. Al disposar d'informació més detallada de Catalunya, s'ha fet un tractament bottom-up en els dominis D2, D3 i D4 (quan es disposava de dades), mentre que per D1 s'ha fet un tractament bottom-down a partir de les emissions del model EMEP. Per alguns sectors dels que no es disposava d'informació detallada, també s'ha aplicat metodologia bottom-down a D2, D3 i D4. Per al domini D1 s'ha fet l'adaptació de les emissions d'EMEP mitjançant un pre-procés que va generar fitxers per cada espècie, mes i dia de la setmana. MNEQA genera el fitxer per la simulació a partir d'aquestes dades. Per la resta de dominis hi ha cinc mòduls d'emissions i dos de post-procés. En cada domini els fitxers que llegeixen els programes estaran adaptats al domini, així per exemple per les emissions biogèniques hi ha un fitxer amb les emissions estàndard d'isoprens pel domini D2, un altre pel domini D3 i un altre pel domini D4. Amb les dades de la simulació meteorològica de cada domini es pot calcular l'emissió d'isoprens per cada hora de simulació, aplicant la corresponent correcció de temperatura i radiació. L'estructuració es pot resumir en els següents punts:

- adaptació d'EMEP a D1
- emissions per Catalunya (D2, D3 i D4):
 - mòdul biogènic
 - mòdul industrial
 - mòdul del trànsit: en circulació, en ciutat, evaporatives.
 - mòdul EMEP: dissolvents i altres vehicles
 - mòdul partícules
- anàlisi de resultats
- escriptura fitxer d'entrada a CMAQ

Els programes dels diferents mòduls han estat compilats i executats amb èxit amb Intel fortran 90 i Portland group fortran 90 en una plataforma Linux. Els fitxers finals s'escriuen en format netCDF perquè és el format requerit pel model fotoquímic CMAQ, per aquest motiu es necessiten les llibreries netCDF.

S'ha treballat cada mòdul en directoris diferents on s'han generat els següents subdirectoris:

- programes: és on es troben els programes sense compilar, després d'executar el Makefile es trobarà el programa executable també.
- dades: és on es troben els fitxers que necessita el mòdul
- treballar: en aquests directoris és on l'script executa els programes
- resultats: en aquests directoris es deixen les sortides de cada mòdul, amb la informació generada del programa.

En ocasions existeixen els subdirectoris:

- `dades_D3` i `dades_D4`, que es refereixen a les dades pels dominis D3 i D4 respectivament.
- `pre_dades` i/o `pre_programes`, es refereixen a `pre_processos` que s'han de fer o que han estat fets i que es deixen per tal d'ajudar en la possible modificació de dades.

A l'Apèndix 7 es detallen els arxius utilitzats per MNEQA per tal de proporcionar el màxim d'informació possible sobre la seva operativitat.

4.3. Comparació amb altres models d'emissions

Existeixen altres models d'emissions per generar les emissions per CMAQ com són el model Sparse Matrix Operator Kernel Emissions (SMOKE) (<http://www.smoke-model.org>) i el model Consolidated Community Emissions Processing Tool (CONCEPT) (<http://www.conceptmodel.org>). Aquests dos models es defineixen com processadors d'emissions, això vol dir que aquests models només adapten les dades d'inventaris d'emissions o les dades provinents de càlculs d'emissions a la resolució temporal i espacial que necessita el sistema de modelització per a la qualitat de l'aire.

Aquests models calculen les emissions biogèniques i del trànsit amb models externs. En concret amb el model Biogenic Emission Inventory System (BEIS) (<http://www.epa.gov/asmdnerl/biogen.html>) pel càlcul de les biogèniques. I el model MOBILE6 (<http://www.epa.gov/otaq/m6.htm>) per les emissions en carretera. A més de tractar les sortides d'aquests models també estan preparats per tractar diferent inventaris d'emissions, per exemple CONCEPT pot tractar les dades del US National Emissions Inventory (ASCII NEIv3) sense necessitat de fer un preprocessat i també les dades en continu de les mesures d'emissions (continuous emissions monitoring, CEM). Mentre que SMOKE està dissenyat per tractar dades amb diferents resolucions temporals referides a la classificació en categories USEPA Source Classification Codes (SCC). Aquests models també utilitzen la funció "gridding" per situar les emissions dels diferents inventaris en el grid dels dominis a utilitzar.

A la Taula 4.1. es mostren algunes característiques dels models MNEQA, SMOKE i CONCEPT. Tots tres són modulars i preparen emissions per CMAQ, tot i que les dades base són diferents i la forma d'entrar al model també. Els tres models estan adaptats a la zona a la que es volen aplicar, en aquest cas, SMOKE i CONCEPT tracten dades d'inventaris per Amèrica del Nord, mentre que MNEQA està adaptat a les dades d'Europa. Per Espanya s'ha publicat una metodologia per fer l'adaptació dels codis que SMOKE utilitza a inventaris de dades per Espanya (Borge et al., 2008) i s'ha aplicat a la zona de Madrid. Una diferència important amb MNEQA és la definició dels altres dos models com de processadors d'emissions i no calculadors d'emissions, això fa que els mòduls d'emissions biogèniques i del trànsit siguin externs als models. MNEQA fa les dues coses, si bé la informació d'entrada ha de ser més específica dels dominis a calcular.

Taula 4.1. Comparació entre models d'emissions aplicables a CMAQ.

característiques \ model	MNEQA	SMOKE	CONCEPT
Nom complet	Model Numèric d'emissions per a la qualitat de l'aire	Sparse Matrix Operator Kernel Emissions	Consolidated Community Emissions Processing Tool
Desenvolupat a	Universitat (UB i UPC) amb finançament governamental	MCNC environmental Modeling Center with the support of USEPA	Consulting firms (LLC, ENVIRON), with State funding
Descripció breu	Càlcul d'emissions	Processador d'emissions	Processador d'emissions
Estructura	Modular	Modular	Modular
Compilador	Fortran 90 (pg, intel)	Portland Group Fortran 90	Postgres SQL
Disponibilitat del Codi o de documentació	No està disponible	Codi i manual d'usuaris (502 pp)	Codi i alguna documentació
Tractament espacial	Dades en matrius o columnes amb el número de cel·la com a inputs	Gridding function (subrutina interna)	Gridding function (subrutina interna)
Aplicació	Europa	US i Canada	US
Dades d'inventaris / inputs	EMEP, dades locals en ASCII en matrius o columnes	formats USEPA: NEI, IDA, EDMS, CEM	NEIv3, CEM
Emissions biogèniques	Mòdul intern	BEIS (mòdul extern)	BEIS (mòdul extern)
Emissions del trànsit	Mòdul intern	MOBILE (mòdul extern)	MOBILE (mòdul extern)
Especiació	CBM-IV	CBM-IV, RADM2, SAPRC99	CBM-IV
Genera inputts per Model de qualitat de l'aire	CMAQ	CMAQ, CAMx4, MAQSIP, REMSAD	CAMx, CMAQ

4.4. Resultats dels casos d'estudi

El model d'emissions s'ha aplicat a 4 casos d'estudi escollits, corresponents a l'any 2003. Aquest any va ser d'especial interès per l'onada de calor que es va viure a tota Europa (Vautard et al., 2005), donant valors elevats de contaminants fotoquímics en àrees poc usuals. S'ha fet la simulació pel període del 10 al 14 de juny de 2003. El dia 10 correspon a un dimarts i el període acaba en dissabte, les temperatures van ser elevades per l'època de l'any, la temperatura mitjana calculada a partir de les dades de les estacions del SMC pel període simulat va ser de 25 °C. Per contra, el segon període es caracteritza per les baixes temperatures, la temperatura mitjana en el període calculada a partir de les dades de les estacions del SMC va ser de 22 °C, aquest període correspon al mes de juliol de l'1 al 5 de juliol, de nou de dimarts a dissabte. Finalment dos simulacions consecutives en el mes d'agost, una de l'1 al 5 d'agost i l'altre del 6 al 10 d'agost, per aquests períodes la temperatura mitjana va ser de 27 °C, l'1 d'agost era divendres i el 5 dimarts, i el 6 d'agost era dimecres acabant en diumenge.

Per la metodologia emprada, entre els diversos casos d'estudi i entre els diferents dies d'una simulació hi pot haver variacions en les emissions, causades per les condicions meteorològiques i pel dia de la setmana. A l'Apèndix 7 es poden veure els valors de les emissions per dia i per sector. Les emissions biogèniques, les emissions evaporatives del trànsit i les emissions de ciutats es veuen afectades per la temperatura. Les emissions del trànsit en circulació són diferents en funció del dia de la setmana, pels perfils horaris aplicats.

Es mostren resultats destacats pels NO_x, VOC i CO a les Taules 4.2., 4.3. i 4.4. respectivament. La selecció dels dies mostrats s'ha fet agafant els valors màxim i mínim d'emissió a cada període, excepte al període de juliol que només es mostra l'emissió per un dels dies per haver-hi poca diferència entre el màxim i mínim. L'emissió de NO_x en el domini D2 per dia en els períodes simulats han donat un valor màxim d'emissió per al 6 d'agost amb 651.2 tones i un valor mínim el 10 d'agost amb 541.9 tones. L'emissió més important de NO_x la causa el sector industrial i de generació elèctrica, englobat a la categoria "Industrials", que són iguals per tots els dies a causa de la manca de dades sobre les hores treballades per la gran majoria de registres. La diferència en les emissions ve donada per les emissions biogèniques que depenen de la temperatura. El valor mínim és per al dia 3 de juliol amb 28.3 tones en les emissions biogèniques, mentre que el 6 d'agost corresponen a 50.1 tones. Les emissions del trànsit en circulació depenen del dia de la setmana, el 3 i el 10 d'agost el valor és un ordre de magnitud inferior per ser diumenges d'agost. En el cas dels NO_x (Taula 4.2) es pot veure que les emissions dominants són les provinents de la indústria i del trànsit.

Taula 4.2. Resultats, en tones per dia (t/dia), de les emissions de NO_x per a cada mòdul de les simulacions amb MNEQA dels períodes de 2003

NO _x t/dia	10/6/03	14/6/03	3/7/03	2/8/03	3/8/03	6/8/03	10/8/03
Biogen	40.9	47.3	28.3	46.9	47.2	50.1	42.7
Industrials	252.3	252.3	252.3	252.3	252.3	252.3	252.3
Trànsit (hot)	109.5	112.8	109.5	112.8	10.5	109.5	10.5
Trànsit ciutats	155.8	156.5	154.8	159.0	159.1	160.4	157.5
EMEP S08	078.9	078.9	78.9	78.9	78.9	78.9	078.9
Total	637.3	647.7	623.7	649.9	548.0	651.2	541.9

En el cas de les emissions de VOCs (Taula 4.3) hi ha més dependència amb les condicions de temperatura i radiació, tant en les emissions biogèniques com en les evaporatives, i les emissions del trànsit en circulació tornen a dependre del dia de la setmana. El dia amb màxim valor d'emissions de VOC torna a ser el 6 d'agost. De nou, a causa del valor alt en les emissions biogèniques, causades per les condicions de temperatura i radiació. El 10 d'agost, diumenge, es pot veure com les emissions del trànsit en circulació (hot) són força inferiors a les dels altres dies. El 3 de juliol li corresponen les menors emissions, tan biogèniques com evaporatives, per les baixes temperatures que es van donar.

Taula 4.3. Resultats de les emissions de VOCs per dia i per mòdul de les simulació amb MNEQA dels períodes de 2003.

VOC t/dia	11/6/03	14/6/03	3/7/03	1/8/03	2/8/03	6/8/03	10/8/03
Biogèniques	406.0	498.4	232.7	406.2	465.0	566.5	430.3
Industrials	55.5	55.5	55.5	55.5	55.5	55.5	55.5
Trànsit (hot)	24.8	25.8	24.8	24.8	25.8	24.8	2.9
Trànsit ciutats	115.6	116.1	114.4	117.5	118.6	120.0	117.1
Evap run	6.2	8.7	3.5	7.4	9.6	12.1	7.8
Evap soak	8.4	9.0	7.9	8.7	9.3	9.3	8.9
Evap diurn	5.6	6.0	4.6	6.0	6.1	7.1	6.1
EMEP S06	235.9	235.9	235.9	235.9	235.9	235.9	235.9
EMEP S08	9.6	9.6	9.6	9.6	9.6	9.6	9.6
Total	867.7	965.1	689.0	871.6	935.6	1040.8	874.2

Respecte el CO (Taula 4.4.), les contribucions en MNEQA per aquest contaminant són causades pel trànsit i la indústria. Pel trànsit en circulació (hot) es troben diferències a causa del dia de la setmana. Tant el 3 d'agost com el 10 del mateix mes, eren diumenges i les emissions pel trànsit són un ordre de magnitud inferior i per tant l'emissió és inferior.

Taula 4.4. Resultats de les emissions de CO per dia i per mòdul de la simulació amb MNEQA dels períodes de 2003.

CO t/dia	10/6/03	14/6/03	3/7/03	2/8/03	3/8/03	9/8/03	10/8/03
Industrials	1116.4	1116.4	1116.4	1116.4	1116.4	1116.4	1116.4
Trànsit (hot)	254.8	262.6	254.8	262.6	21.6	262.6	21.6
Trànsit ciutats	955.5	956.2	954.6	958.8	958.9	957.5	957.3
Total	2326.7	2335.2	2325.8	2337.9	2096.9	2336.5	2095.3

A continuació es mostren gràficament alguns mapes amb emissions per als diferents sectors considerats.

Les figures 4.2. fins a 4.12. mostren les emissions per la simulació del dia 13 de juny de 2003. A la Figura 4.2. es poden veure representades les emissions biogèniques per NO_x a les 6 UTC i 12 UTC. S'observa un increment en les emissions a causa de la variació diürna de la temperatura, sobretot a la zona de Lleida. Un efecte diferent es pot observar en la representació dels VOCs (Figura 4.3.), on les zones més afectades per la temperatura es troben al Prepirineu, al Pirineu i al sud de Catalunya. De nou les emissions són majors al migdia que al matí, per la variació diürna de la temperatura.

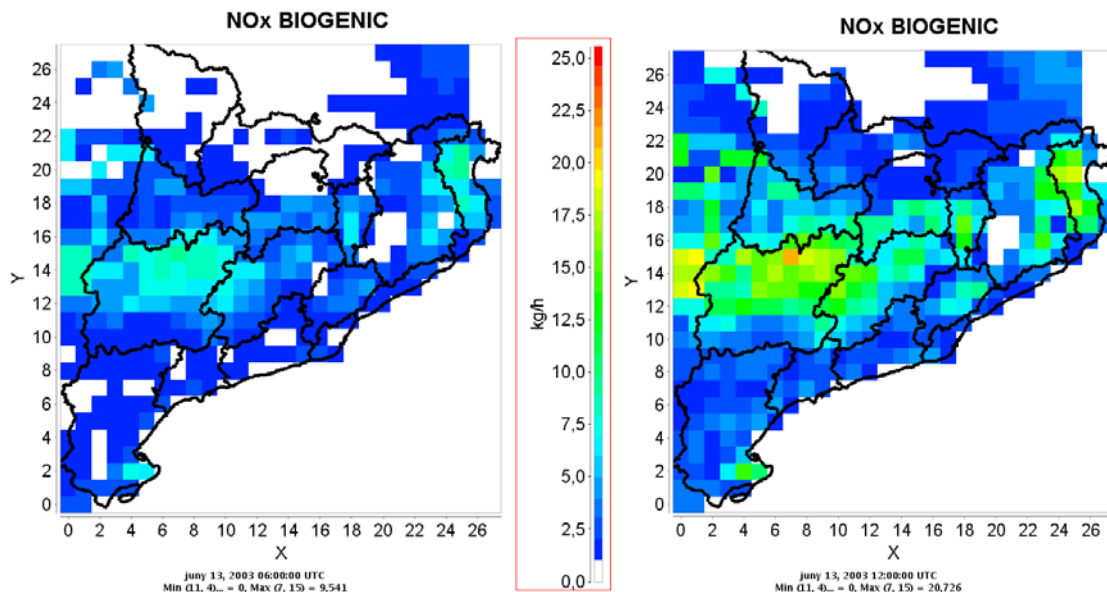


Figura 4.2. Emissions de NO_x en kg/h causades per la vegetació, emissions biogèniques, a les 6 UTC (esquerra) i a les 12 UTC (dreta) del 13 de juny de 2003 calculades amb MNEQA.

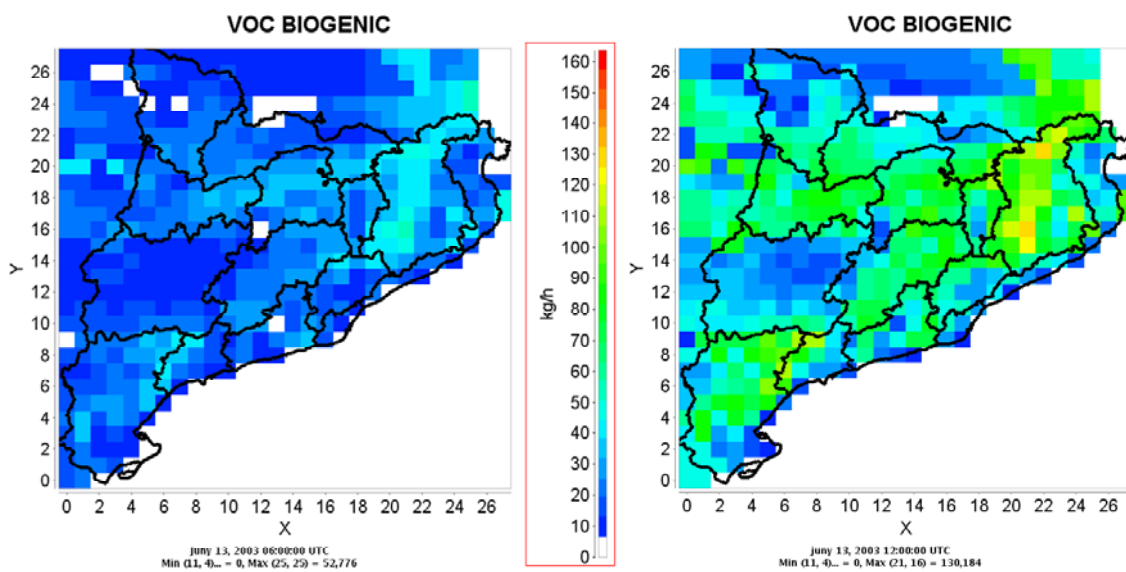


Figura 4.3. Emissions de VOC en kg/h causades per la vegetació, emissions biogèniques, a les 6 UTC (esquerra) i a les 12 UTC (dreta) del 13 de juny de 2003 calculades amb MNEQA.

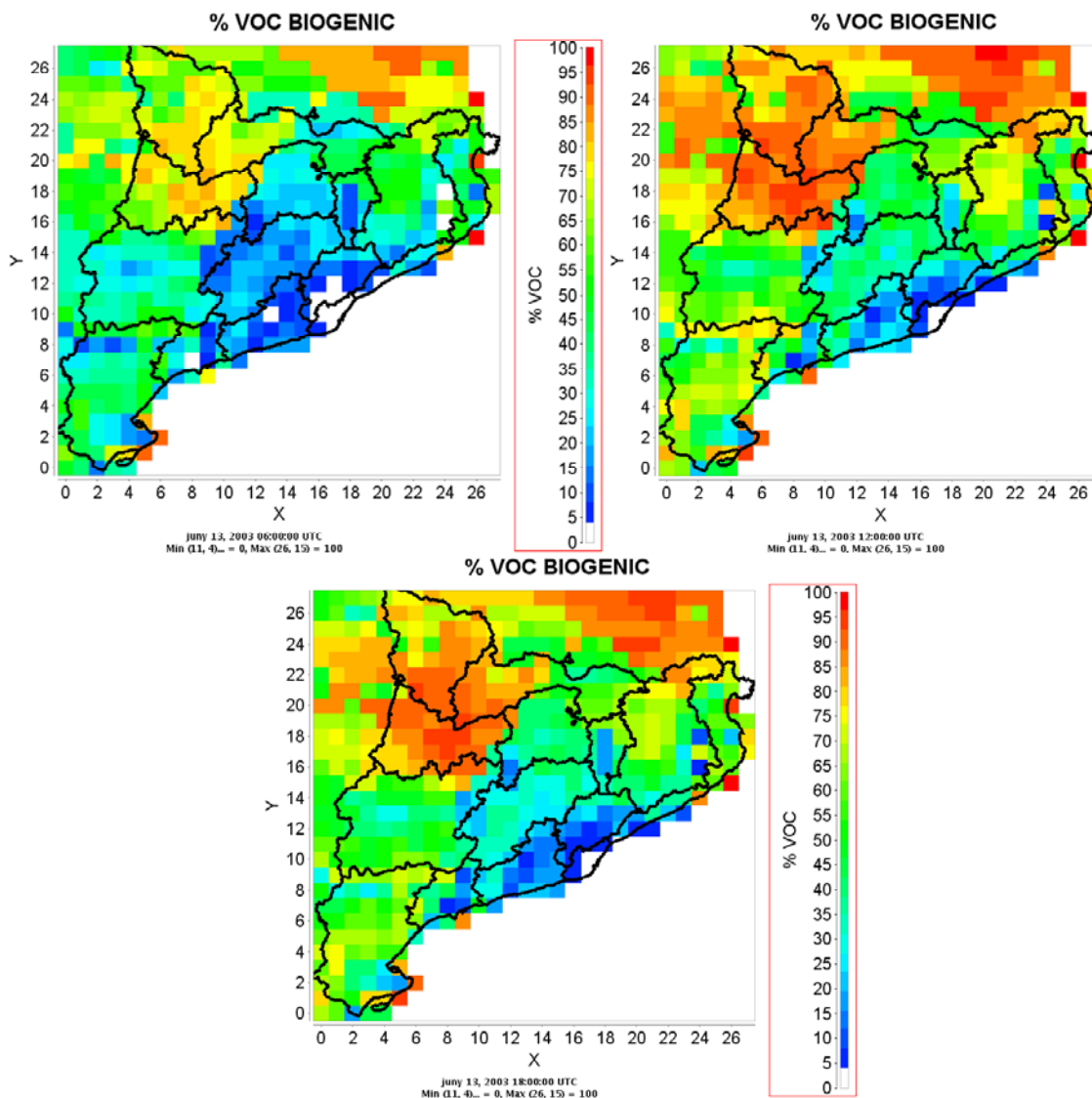


Figura 4.4. Percentatge de les emissions biogèniques de VOCs respecte el total d'emissions de VOCs per al 13 de juny de 2003 a les 6 UTC (esquerra dalt), a les 12 UTC (dreta dalt) i a les 18 UTC (sota).

Una de les sortides del model MNEQA és el tant per cent que l'emissió de cada mòdul representa respecte el total d'emissions i aquesta informació l'obtenim per cada hora de la simulació. A la Figura 4.4. podem veure com a les 6 UTC del dia 13 de juny, les emissions de VOC biogèniques representen una contribució de l'ordre del 60 % quan ens allunyem de la zona de Barcelona, amb uns valors més alts al nord i al nord-oest del domini. Una contribució més marcada es pot observar a les 12 UTC, en que les emissions biogèniques són majors per la influència de la temperatura i de la radiació, i observem zones de color ataronjat i vermell, que indiquen un tant per cent elevat de la contribució de les emissions biogèniques de VOC respecte les emissions totals.

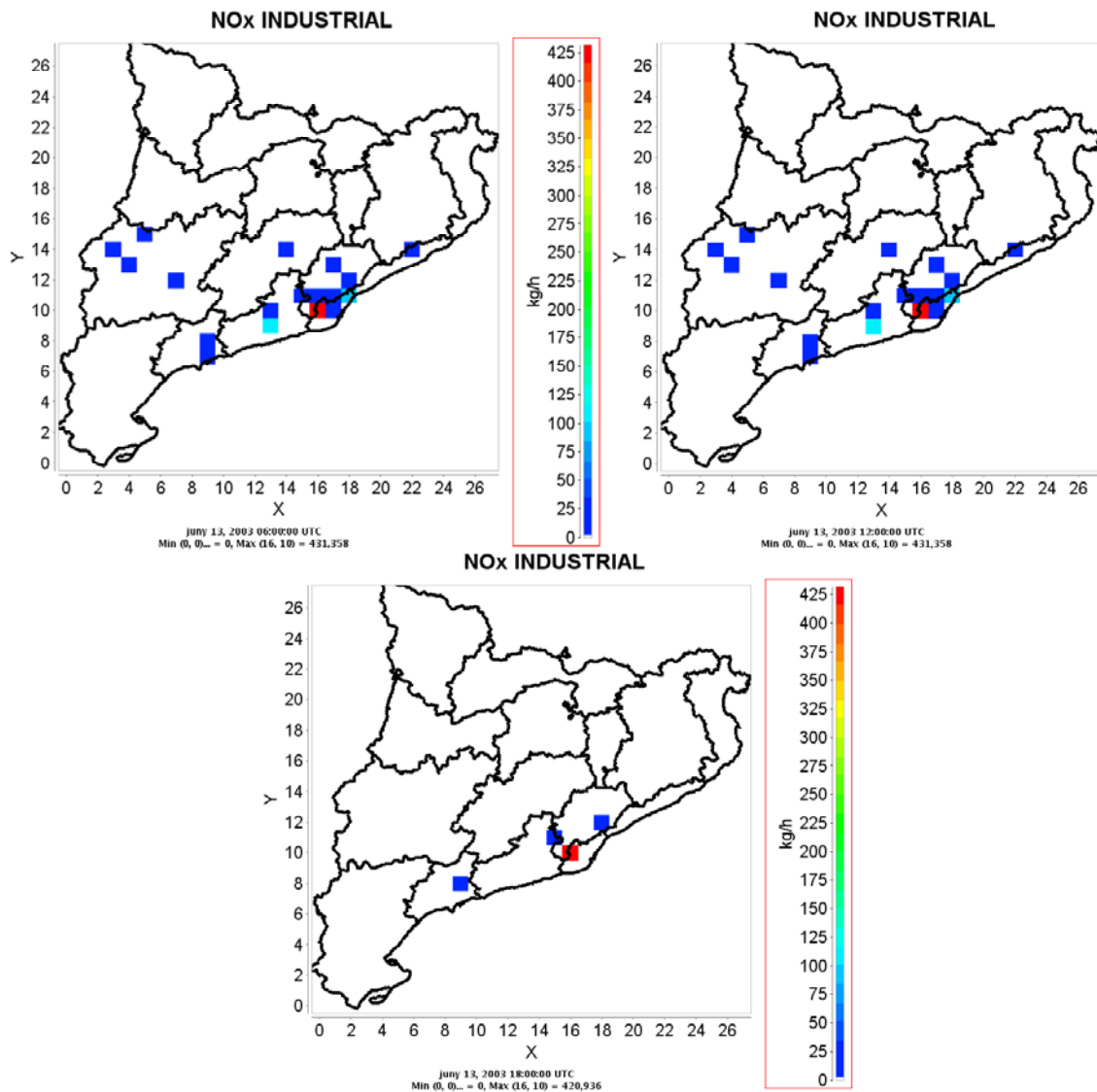


Figura 4.5. Emissions de NO_x en kg/h provinents de la indústria, emissions industrials, a les 6 UTC (esquerra dalt), a les 12 UTC (dreta dalt) i a les 18 UTC (sota) del 13 de juny de 2003 calculades amb MNEQA.

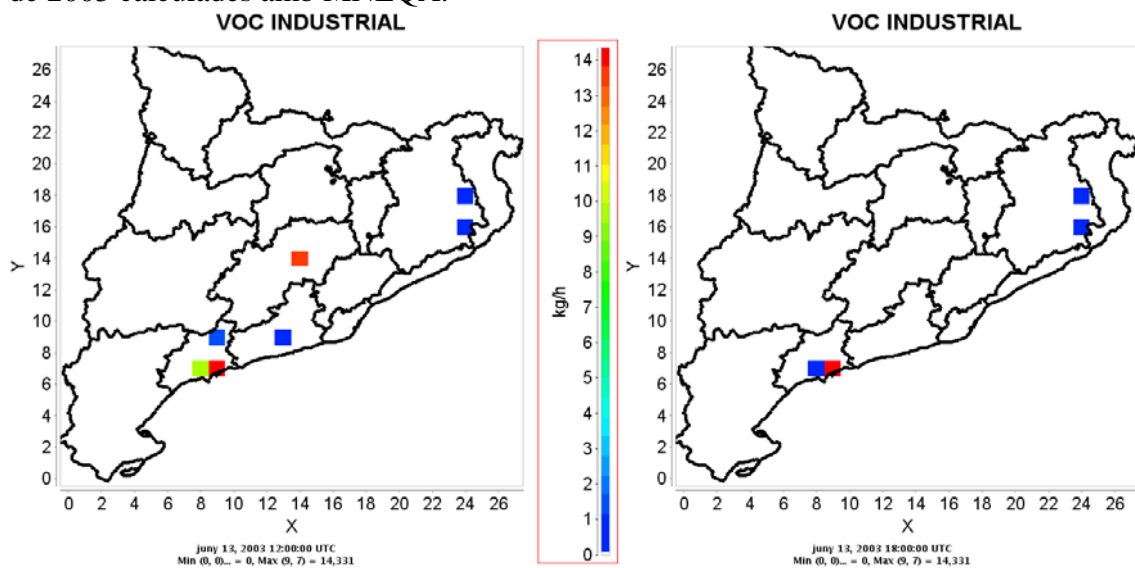


Figura 4.6. Emissions de VOCs en kg/h provinents de la indústria a les 12 UTC (esquerra) i 18 UTC (dreta) per al 13 de juny de 2003 calculades amb MNEQA.

A les Figures 4.5. i 4.6 es pot veure la distribució per les emissions industrials, molt més localitzades que les biogèniques que tenen un efecte de cobertura del territori. Observem certes caselles amb valors alts d'emissió a prop de Barcelona. Respecte l'emissió en les diferents hores, hi ha una diferència important entre les hores del matí i les de la tarda, a les 18 UTC veiem com han desaparegut alguns dels focus emissors, és a causa del perfil horari aplicat. Respecte els VOC provinents de les emissions industrials es pot veure com hi ha menys punts emissors en relació als NO_x . Cal tenir en consideració que l'emissió petita d'algunes fonts no es veu representada en aquests mapes a causa de l'escala. En canvi, al representar el percentatge de l'emissió de NO_x respecte el total emès (Figura 4.7), s'observen molts més punts amb emissió industrial. S'observa també que l'emissió té una contribució diferent segons la casella en la que està.

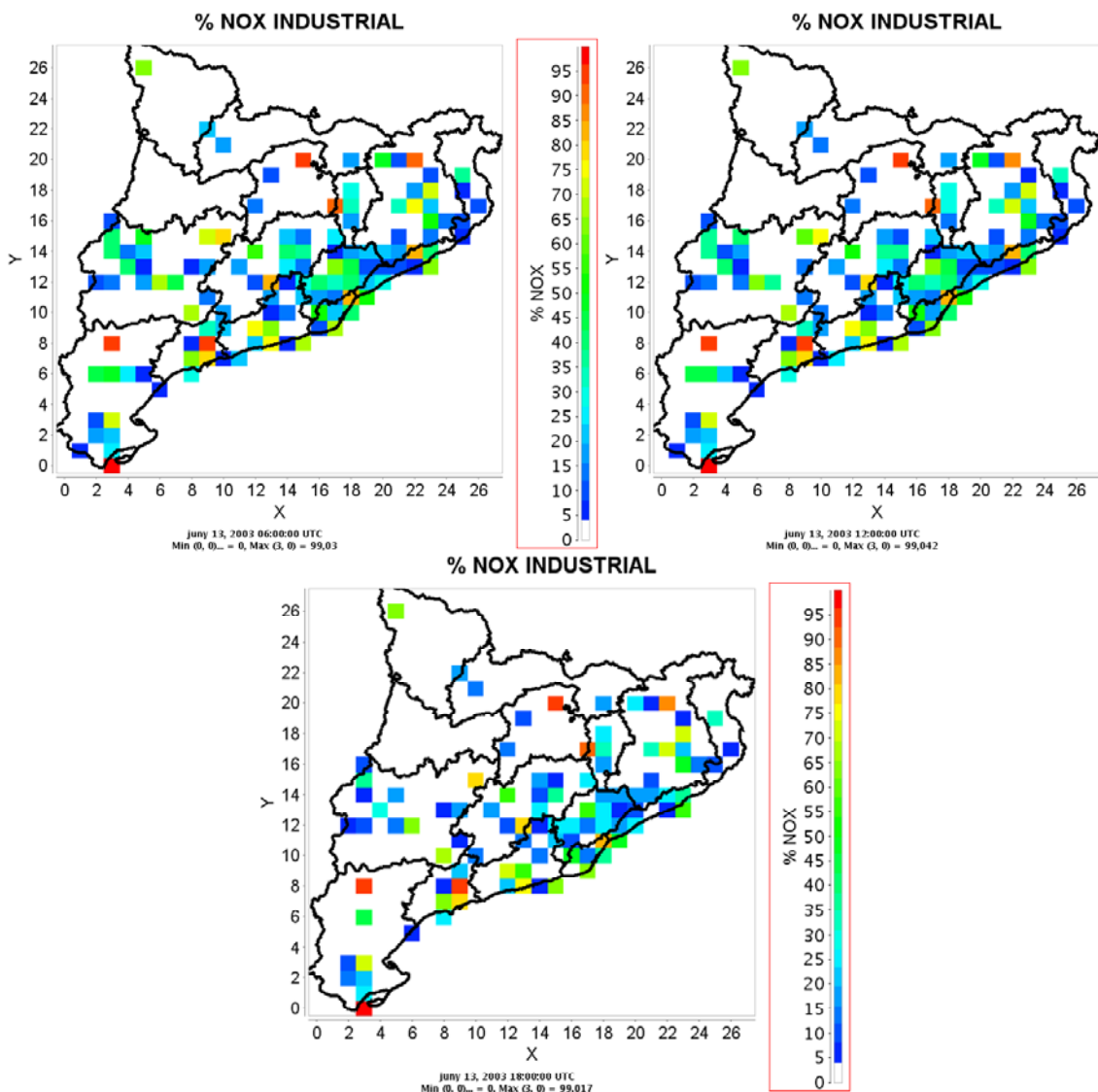


Figura 4.7. Percentatge de les emissions industrials de NO_x respecte el total d'emissions de NO_x per al 13 de juny de 2003 a les 6 UTC (esquerra dalt), a les 12 UTC (dreta dalt) i a les 18 UTC (sota).

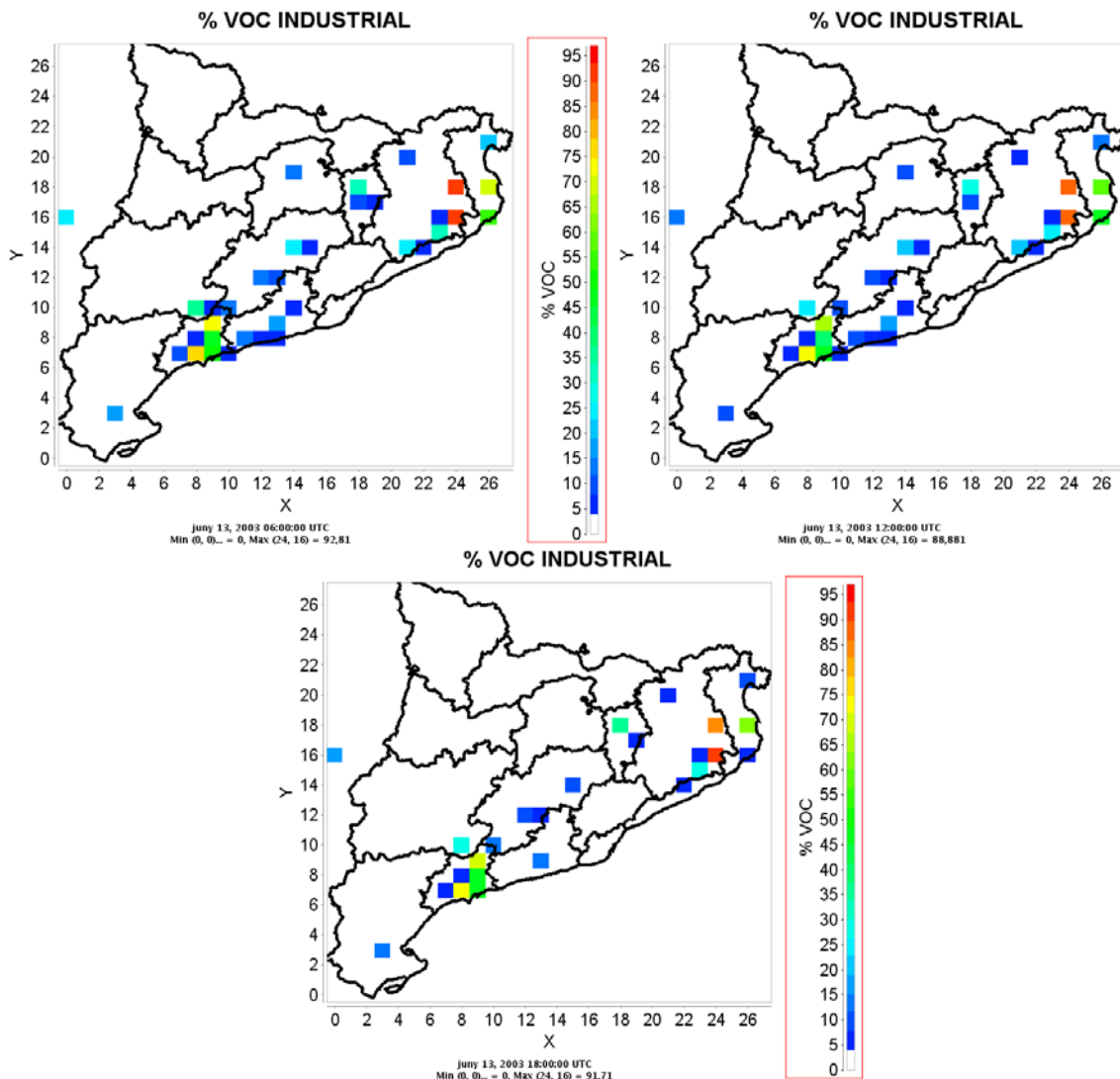


Figura 4.8. Percentatge de les emissions industrials de VOCs respecte el total d'emissions de VOCs per al 13 de juny de 2003 a les 6 UTC (esquerra dalt), a les 12 UTC (dreta dalt) i a les 18 UTC (sota).

El percentatge dels VOCs (Figura 4.8.) industrials és força menor al dels NO_x industrials, tant en el que fa referència a la cobertura espacial com en el valor per les cel·les on té rellevància. Podem veure poques cel·les amb colors verds, grocs i vermells que representarien una contribució elevada en les emissions de VOCs, mentre que en els NO_x s'observaven diverses caselles amb contribució en l'emissió superior al 50 % (colors verds, grocs i vermells).

En relació a les emissions de NO_x causades pel trànsit, s'ha vist anteriorment que les més rellevants són les emissions del trànsit en circulació (hot) i les del trànsit en ciutats, per això en el mapa de les emissions del trànsit (totals) que es mostra a la Figura 4.9 es veu clarament el patró de la conjunció d'aquests dos efectes. S'observa la influència de les emissions en circulació incrementades amb les emissions de ciutats. Les emissions de NO_x a causa del trànsit en circulació (Figura 4.10) mostra les vies de comunicació més importants connectant amb Barcelona, com són, l'autopista AP2 o la AP7. Les emissions de NO_x a causa del trànsit en ciutats (Figura 4.11) mostra emissions importants a l'entorn de Barcelona i cap al Sud per la costa.

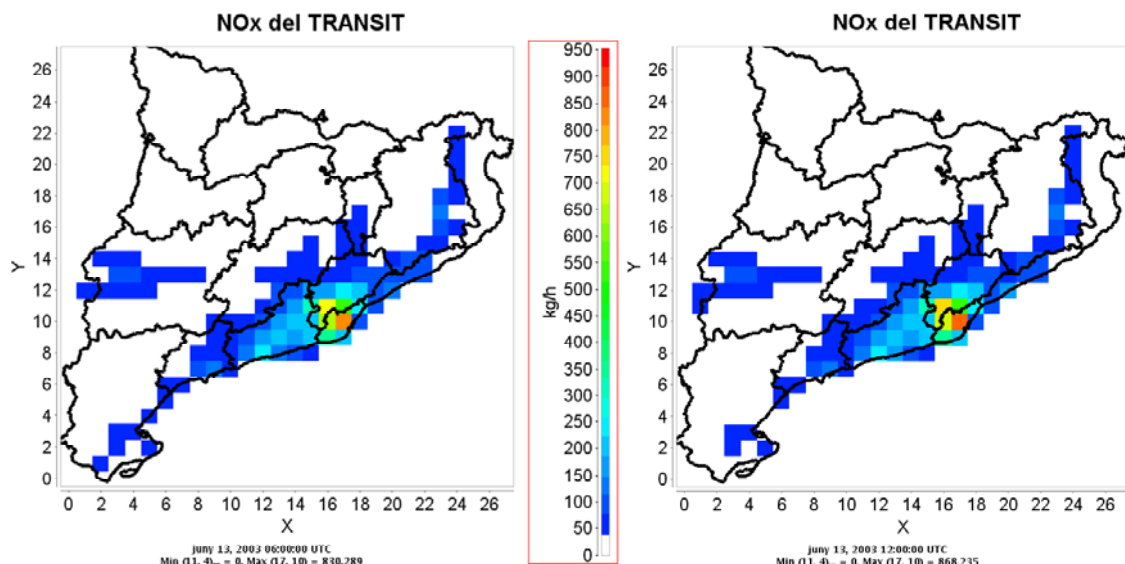


Figura 4.9. Emissions de NO_x en kg/h provinents del trànsit a les 6 UTC (esquerra) i a les 12 UTC (dreta) del 13 de juny de 2003 calculades amb MNEQA.

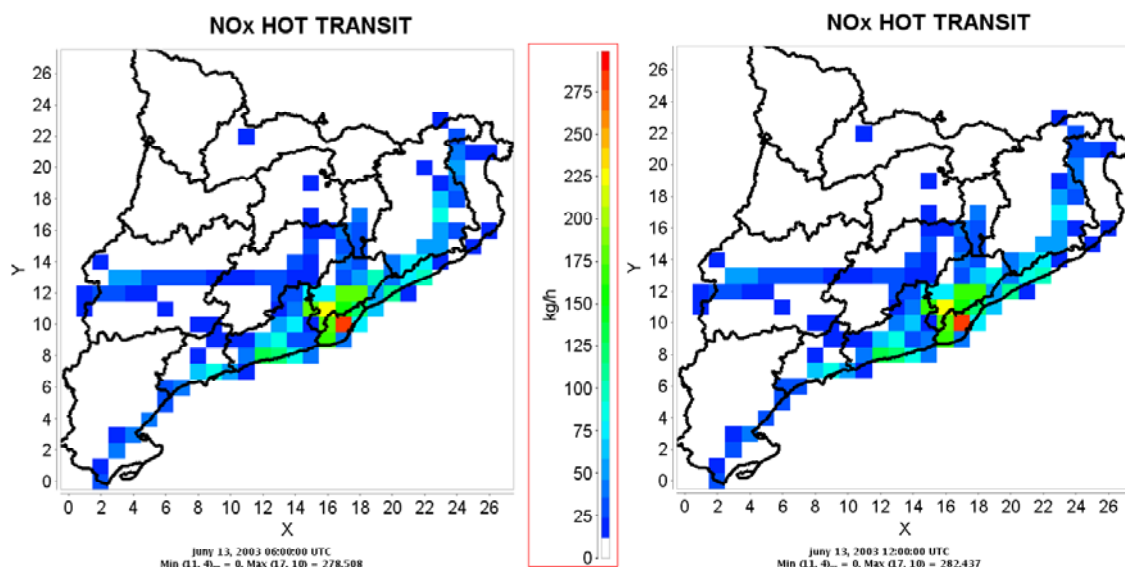


Figura 4.10. Emissions de NO_x en kg/h provinents del trànsit en circulació a les 6 UTC (esquerra) i a les 12 UTC (dreta) del 13 de juny de 2003 calculades amb MNEQA.

Respecte el percentatge que suposen les emissions del trànsit en l'emissió de VOC (Figura 4.12.), s'observa una cobertura del territori a causa de la metodologia emprada en les emissions de ciutats. Aquesta metodologia dóna una emissió a cada cel.la depenent de la distància a les ciutats més poblades. Donat que les altres emissions que tenen efecte de cobertura del territori són les emissions biogèniques i en el cas del NO_x emès és una quantitat petita en comparació amb el atribuït al trànsit, el resultat és aquesta contribució destacada per gairebé totes les hores del dia, amb un descens important en les hores nocturnes.

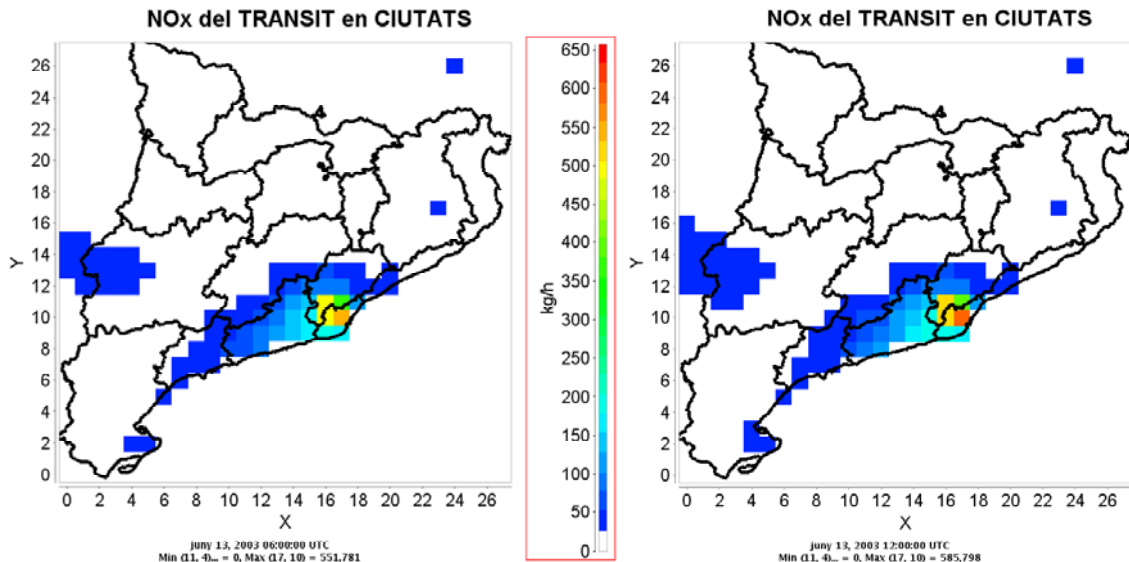


Figura 4.11. Emissions de NO_x en kg/h provinents del trànsit en ciutats a les 6 UTC (esquerra) i a les 12 UTC (dreta) del 13 de juny de 2003 calculades amb MNEQA.

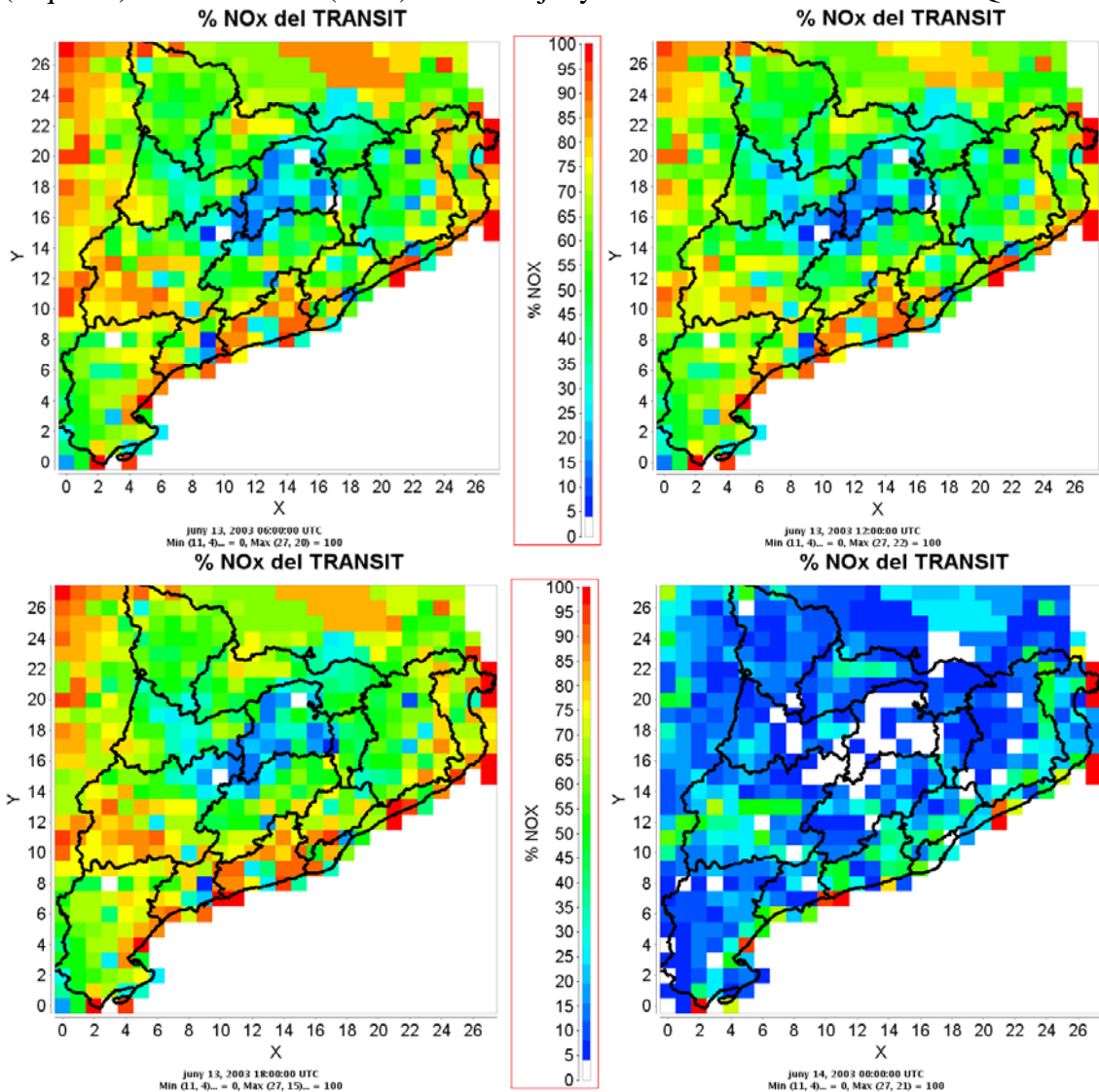


Figura 4.12. Percentatge de les emissions del trànsit de NO_x respecte el total d'emissions de NO_x per al 13 de juny de 2003 a les 6 UTC (esquerra dalt), a les 12 UTC (dreta dalt), a les 18 UTC (esquerra sota) i a les 24 UTC (dreta sota).

Les emissions de VOC provinents del trànsit (figures 4.13 i 4.14) tenen una estructura similar a les dels NO_x; aquest comportament era d'esperar ja que la metodologia és la mateixa. El volum de trànsit a les carreteres no depèn del contaminant, dada de la qual depenen les emissions en circulació; al igual que la distribució de població utilitzada en el càlcul de les emissions en ciutats, que també és per ambdós contaminants la mateixa. L'única diferència és l'aparició de les emissions evaporatives, que venen a sumar en les emissions de VOCs pel trànsit. Aquestes emissions fan que el patró que segueixen les emissions totals de VOCs causades pel trànsit quedi més centrat en Barcelona i l'àrea metropolitana. Això és degut a que és la zona amb major volum de cotxes, en circulació i registrats, i major nombre d'habitants

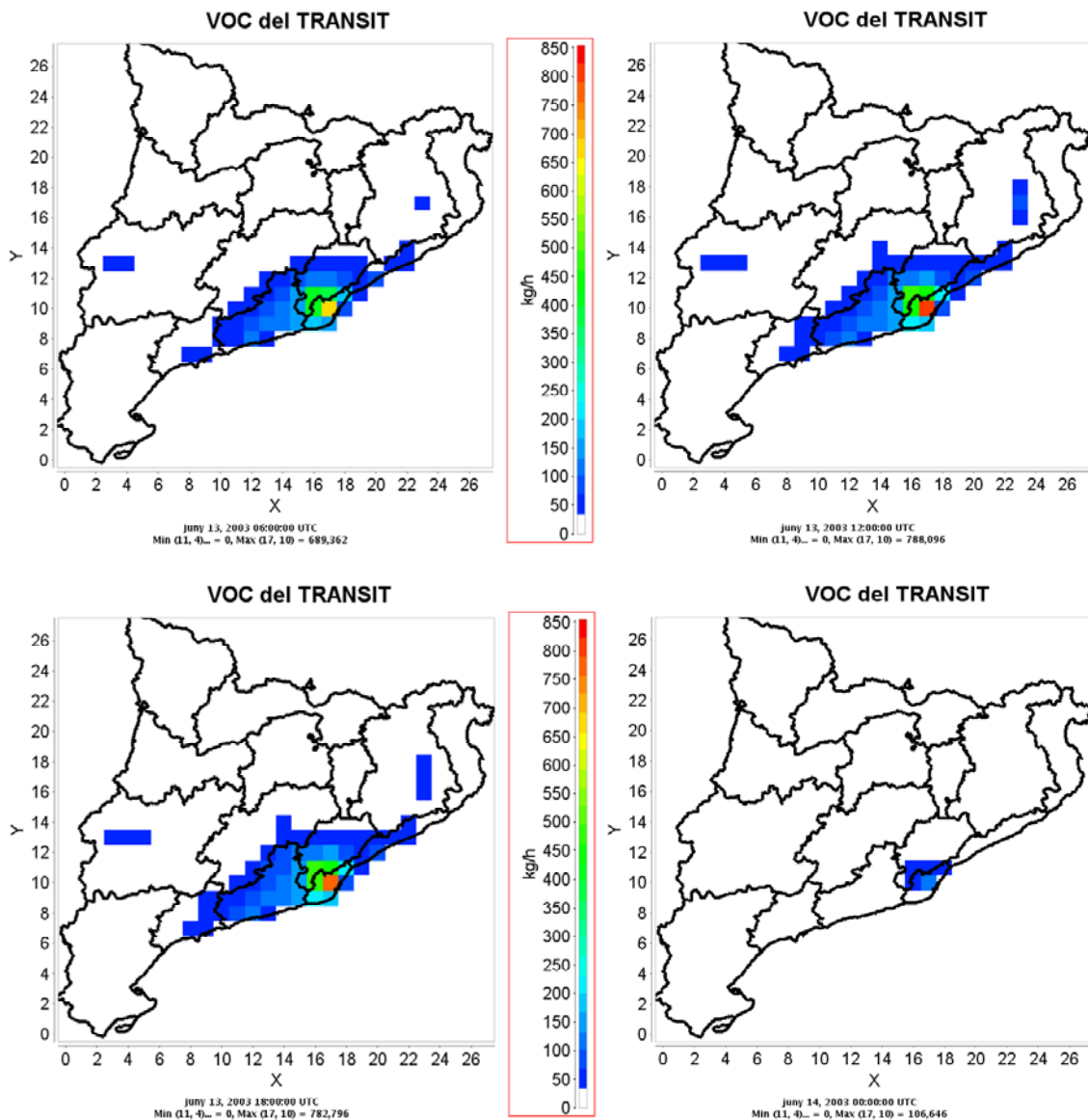


Figura 4.13. Emissions de VOCs en kg/h provinents del trànsit a les 6 UTC (esquerra dalt), a les 12 UTC (dreta dalt), a les 18 UTC (esquerra sota) i a les 24 UTC (dreta sota) del 13 de juny de 2003 calculades amb MNEQA.

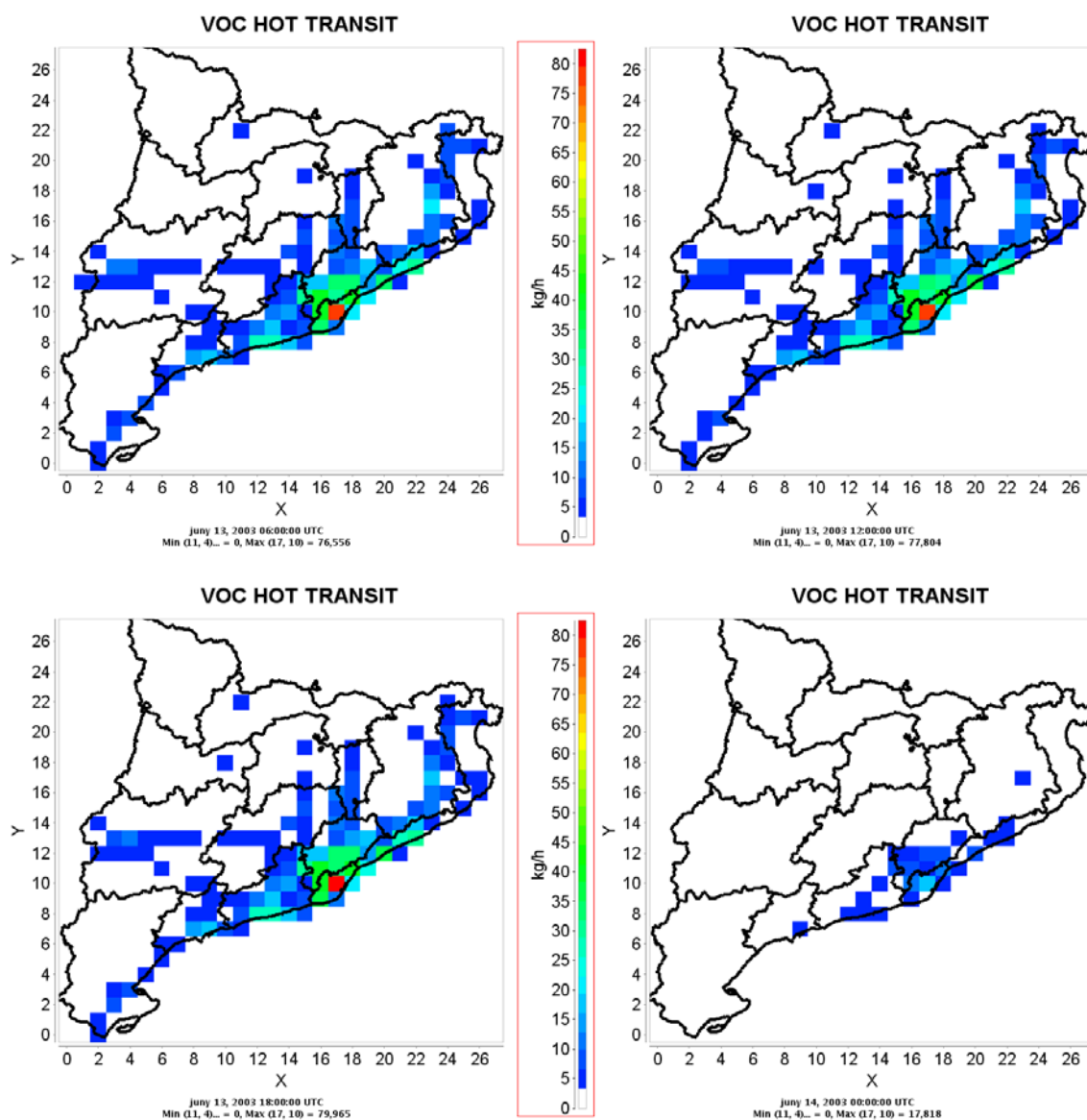


Figura 4.14. Emissions de VOCs en kg/h provinents del trànsit en circulació a les 6 UTC (esquerra dalt), a les 12 UTC (dreta dalt), a les 18 UTC (esquerra sota) i a les 24 UTC (dreta sota) del 13 de juny de 2003 calculades amb MNEQA.

L'emissió de VOCs del trànsit en ciutats (Figura 4.15.) mostra una forta variació entre les hores diürnes i les nocturnes, on esdevé pràcticament nul. El patró segueix sent màxim a l'entorn de Barcelona.

Les diferents emissions evaporatives de VOCs tenen una contribució moderada al total d'emissions, que no pot ser menyspreada en cap cas. Les evaporatives en circulació (run) segueixen el patró de les carreteres més transitades (Figura 4.16.). Mentre les evaporatives per l'apagat del motor (soak) (Figura 4.17.) o per l'evolució diürna de la temperatura (T) (Figura 4.18) es basen en la distribució de població, sent rellevants en les caselles on hi ha nuclis urbans importants.

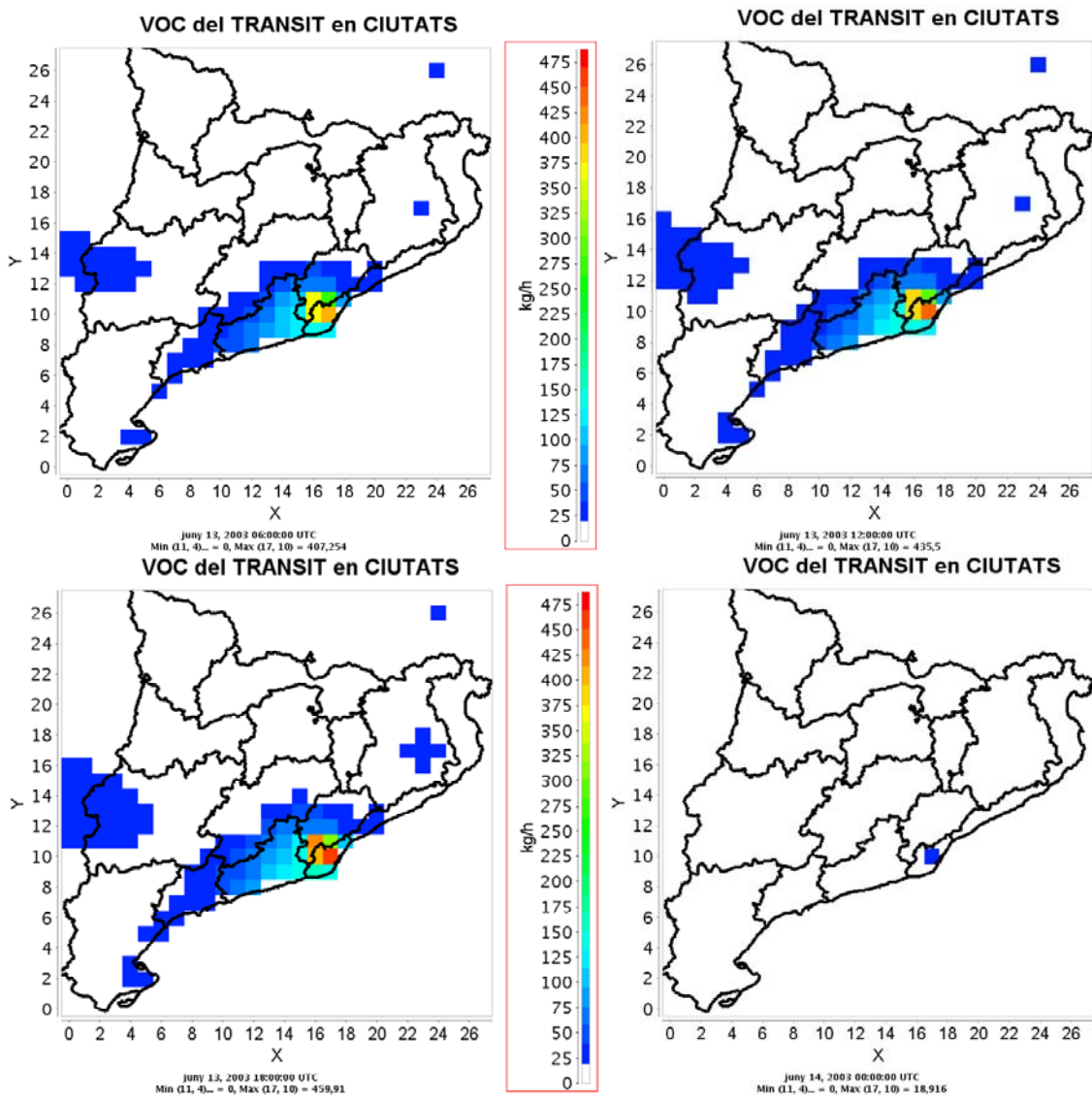


Figura 4.15. Emissions de VOCs en kg/h provinents del trànsit en ciutats a les 6 UTC (esquerra dalt), a les 12 UTC (dreta dalt), a les 18 UTC (esquerra sota) i a les 24 UCT (dreta sota) del 13 de juny de 2003 calculades amb MNEQA.

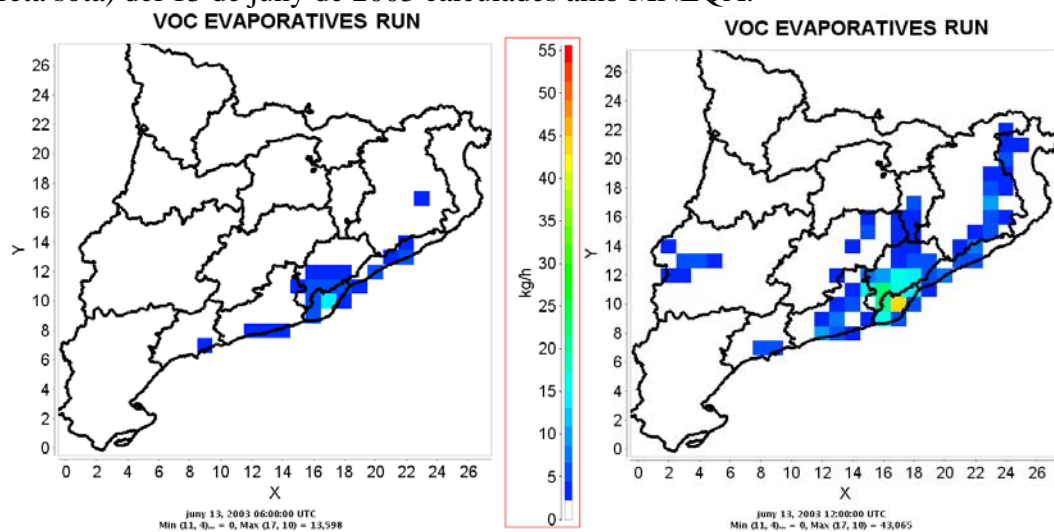


Figura 4.16. Emissions de VOCs en kg/h provinents de l'evaporació en el trànsit en circulació a les 6 UTC (esquerra) i a les 12 UTC (dreta) del 13 de juny de 2003.

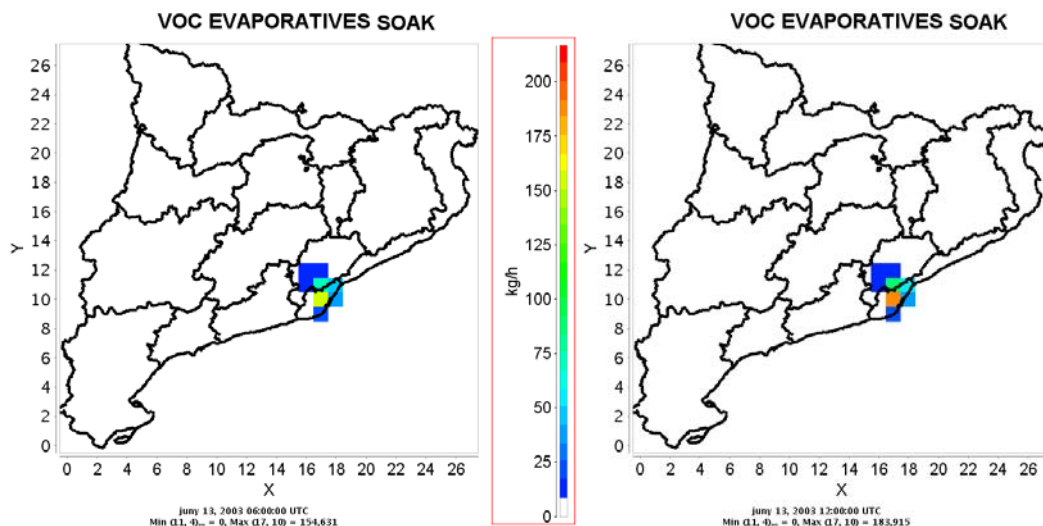


Figura 4.17. Emissions de VOCs en kg/h provinents de l'evaporació en l'apagat del motor a les 6 UTC (esquerra) i a les 12 UTC (dreta) del 13 de juny de 2003 calculades amb MNEQA.

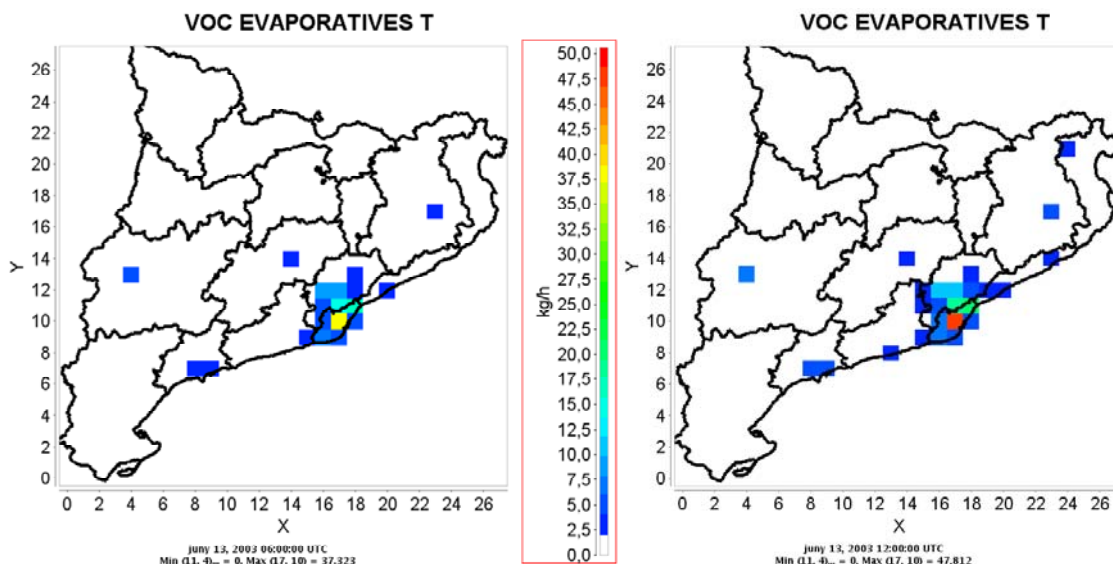


Figura 4.18. Emissions de VOCs en kg/h provinents de l'evaporació per la variació diürna de la temperatura a les 6 UTC (esquerra) i a les 12 UTC (dreta) del 13 de juny de 2003 calculades amb MNEQA.

Aquest desglossament de les emissions permet fer una valoració qualitativa de les emissions calculades amb MNEQA, que només amb la informació de les emissions totals de NO_x (Figura 4.19) i de VOCs (Figura 4.20) no es podria fer. A més, la visualització dóna la imatge de com es distribueixen les emissions, la qual cosa no podem apreciar només amb els valors per dia. Era d'esperar que les emissions es distribuïssin a l'entorn de la ciutat més important del domini, Barcelona, i els seus entorns, també al llarg de la costa, zona on es situa gran part de la població i de l'activitat industrial. Cal a dir que, en les figures, el blanc només representa l'emissió nul·la en la zona del mar, en els altres punts del territori indica valors inferior al mínim de l'escala amb color.

Respecte les diferents hores, durant el dia no s'aprecia una diferència destacable entre els valors de les emissions, i només a les hores nocturnes, quan l'activitat disminueix

sensiblement en tots els àmbits, les emissions tenen un descens destacable. D'altra banda, en les emissions totals de NO_x , es veu clarament l'efecte de les emissions en carretera i en les emissions totals de VOCs destaquen les contribucions que tenen efecte de cobertura del territori, les del trànsit en ciutats i les biogèniques que en sumar-se apareixen en la representació.

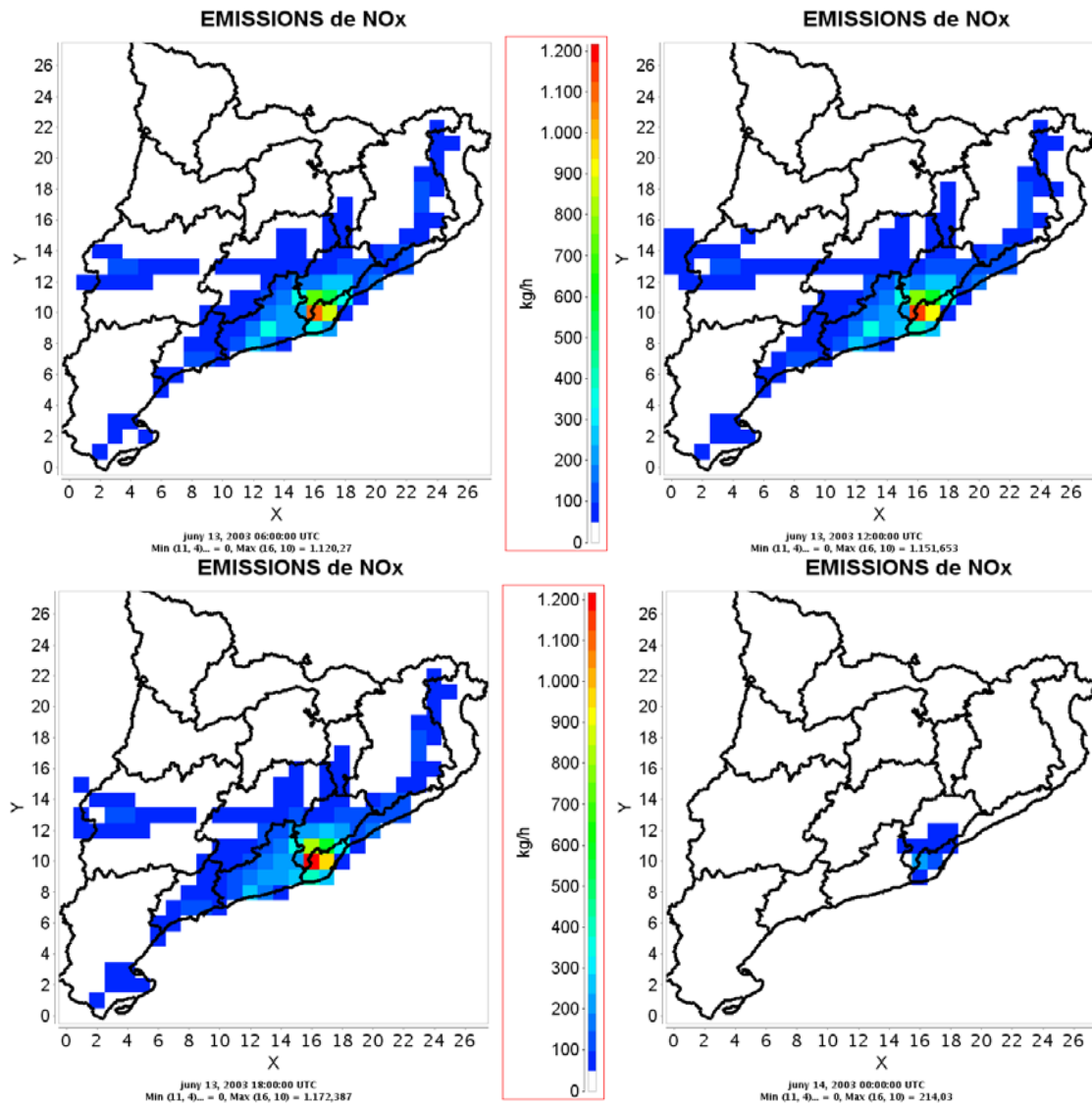


Figura 4.19. Emissions totals de NO_x en kg/h a les 6 UTC (esquerra dalt), a les 12 UTC (dreta dalt), a les 18 UTC (esquerra sota) i a les 24 UTC (dreta sota) del 13 de juny de 2003 calculades amb MNEQA.

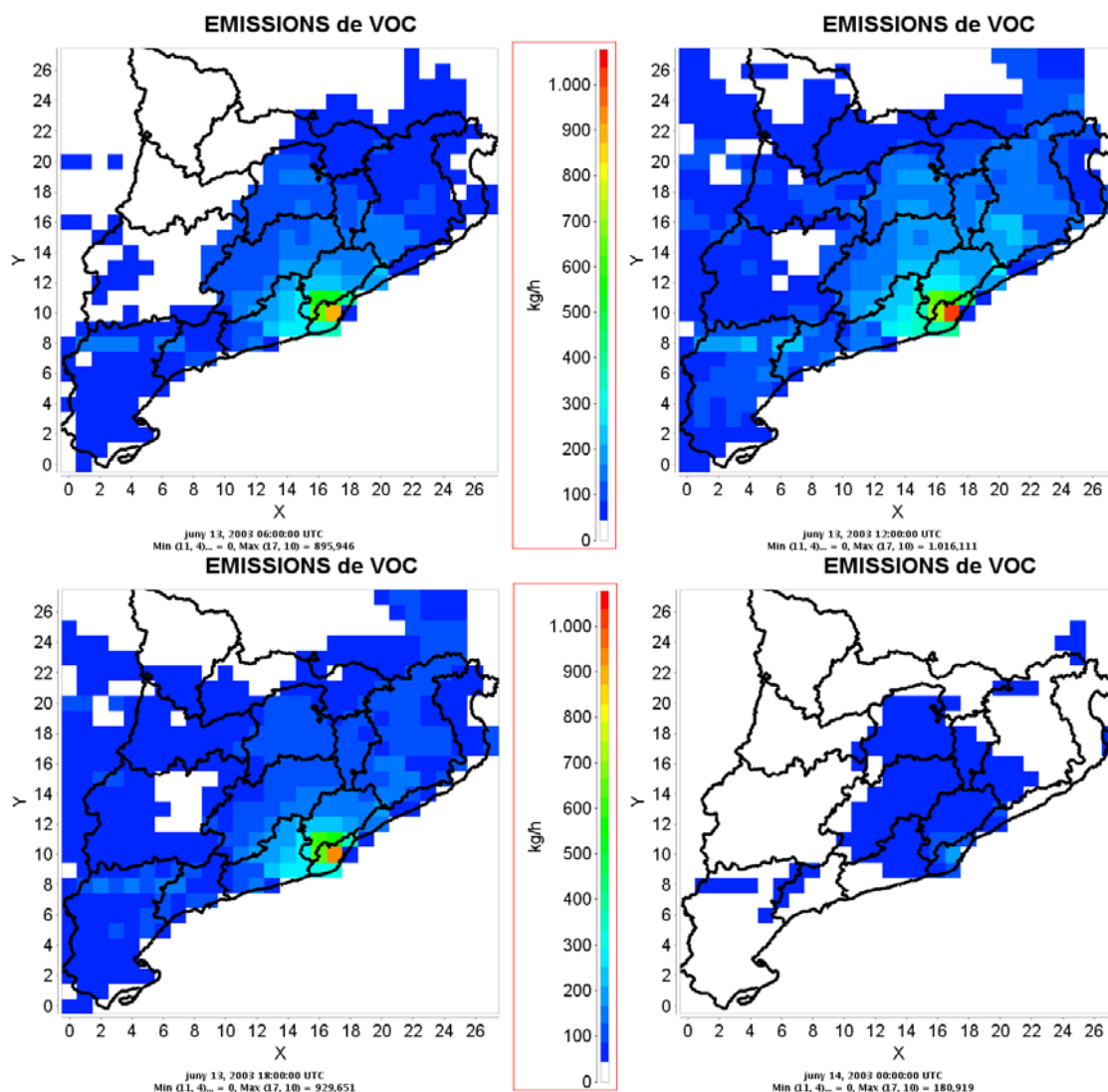


Figura 4.20. Emissions totals de VOCs en kg/h a les 6 UTC (esquerra dalt), a les 12 UTC (dreta dalt), a les 18 UTC (esquerra sota) i a les 24 UTC (dreta sota) del 13 de juny de 2003 calculades amb MNEQA.

4.5. Incertesa en les emissions

La validació de les emissions és una tasca difícil per la manca de mesures. La necessitat dels models d'emissions és precisament a causa d'aquest desconeixement de les emissions. Donat que no hi ha dades que es puguin considerar més bones que el model, ja que quan existeixen aquestes dades "més bones" s'incorporen al model i deixen de ser útils per la validació. Això fa que la validació d'emissions sigui gairebé impossible, l'únic que es pot fer és comparar amb altres models i valorar les diferències.

Per poder comparar models han de ser coincidents els àmbits d'aplicació tant temporal com espacial. Una comparació amb el model EMEP, agafant com a mostra un promig dels dies de juny es mostra a la Taula 4.5. La comparació s'ha fet amb els valors de les caselles coincidents entre els dominis dels dos models (veure Figura 4.21.). En concret, amb les caselles del domini D2 emprat a MNEQA, sumant les emissions de les caselles coincidents amb el domini EMEP, per un dia. De les caselles coincidents d'EMEP s'han sumat les emissions i s'ha dividit per 365 dies per passar de les emissions anuals a un valor promig per dia.

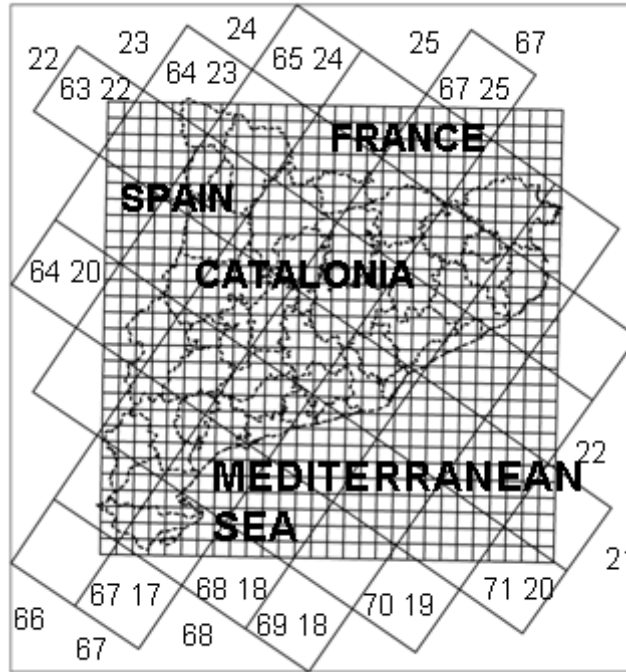


Figura 4.21. Domini D2 utilitzat en les simulacions amb MNEQA (quadrícula menor) i caselles de la quadrícula del model EMEP amb numeració per la mateixa zona.

La diferència en el NO_x provinent del trànsit entre els dos models és del 4.7 %, mentre que en els VOCs és del 44.1 %. En els dos casos l'emissió a MNEQA és major que la d'EMEP, això es pot deure al fet que s'ha agafat un dia d'estiu com a típic. En els VOCs provinents de les emissions evaporatives la temperatura té un efecte important i per això donaria un valor tan gran en relació a l'emissió d'EMEP que partia de la dada anual i el valor per dia representa l'emissió mitjana per dia.

Respecte la indústria, el model MNEQA dona una diferència positiva respecte el model EMEP en el cas dels NO_x . Mentre que pels VOCs la diferència és negativa. MNEQA considera un 32% més d'emissió industrial. Les dades utilitzades en el càlcul de les emissions industrials provenien d'un inventari proporcionat pel DMAH i on s'havia fet un esforç per obtenir un inventari acurat de NO_x , en canvi els VOC necessitaven ser completats i això explicaria la diferència negativa en el que respecta a les emissions de VOCs. Aquestes emissions són a MNEQA un 47 % menors que les considerades per EMEP.

Taula 4.5. Valors per dia de les emissions de NO_x i VOC amb els models MNEQA i EMEP i diferència normalitzada (DN)

(kg/dia)	MNEQA NO_x	EMEP NO_x	NO_x DN	MNEQA VOC	EMEP VOC	VOC DN
Trànsit	$2.65 \cdot 10^5$	$2.53 \cdot 10^5$	4.7%	$1.60 \cdot 10^5$	$1.11 \cdot 10^5$	44.1 %
Indústria	$2.52 \cdot 10^5$	$1.90 \cdot 10^5$	32 %	$0.56 \cdot 10^5$	$1.05 \cdot 10^5$	-46.7 %
Totals sense biogèniques	$5.96 \cdot 10^5$	$5.67 \cdot 10^5$	5.1 %	$4.62 \cdot 10^5$	$5.67 \cdot 10^5$	-18.5 %

Quan es comparen els valors totals d'emissions cal excloure-hi les emissions biogèniques, perquè no estan contemplades en el model d'emissions EMEP. Els resultats per les emissions totals donen una diferència del 5.1 % en el cas dels NO_x i del -18.5 % en el cas dels VOCs. S'observa un compensació entre les diferències en les emissions del sector industrial i del trànsit en el cas dels VOCs. Cal a dir que el model MNEQA

utilitza algunes dades del model EMEP com les cusades per l'ús de disolvents, això juntament amb la compensació entre trànsit i indústria fa que les diferències es redueixin quedant en un 18.5 %. Respecte els NO_x la diferència és força menor.

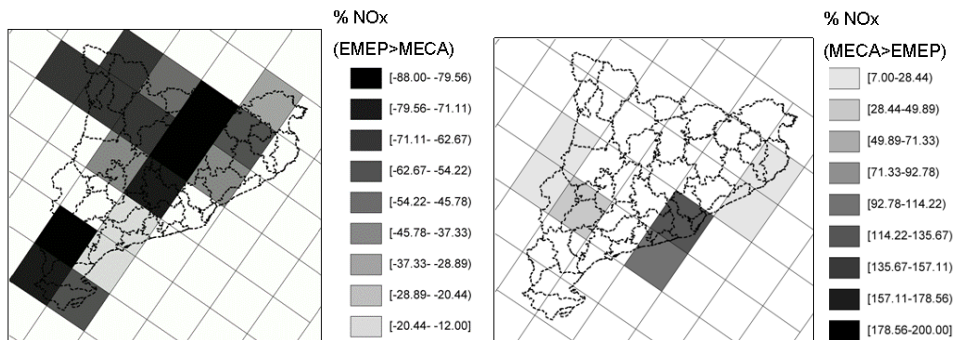


Figura 4.22. Diferència normalitzada (%) entre les emissions de NO_x provinents del trànsit de MNEQA i EMEP, prenent com a valor de referència EMEP. A l'esquerra diferència positiva (EMEP>MNEQA). A la dreta diferència negativa (MNEQA>EMEP)

Analitzant les diferències espacials, es pot veure que hi ha una forta discrepància entre ambdós models (Figura 4.22. i Figura 4.23). La primera diferència important és la zona de Barcelona, MNEQA atribueix la major part de les emissions a aquesta zona, mentre que EMEP l'atribueix a la zona de la Catalunya central. En el cas dels NO_x podem veure que si bé la diferència entre els valors totals del domini no era molt rellevant, les diferències en la distribució espacial són totals.

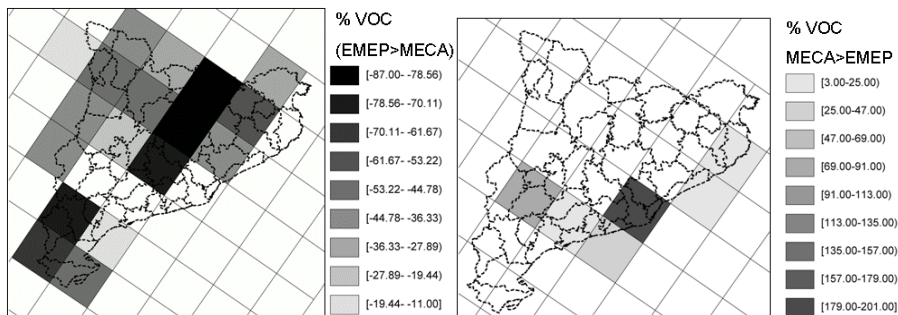


Figura 4.23. Diferència normalitzada (%) entre les emissions de VOCs provinents del trànsit de MNEQA i EMEP, prenent com a valor de referència EMEP. A l'esquerra, diferència positiva (EMEP>MNEQA). A la dreta, diferència negativa (MNEQA>EMEP).

No es pot concloure que un model sigui millor que l'altre, només podem valorar les diferències entre els models. Tot i que la distribució espacial entre ambdós models és força diferent pel sector trànsit, patró que es repeteix en la distribució de les emissions totals, els valors d'emissions totals del domini no presenten grans discrepàncies. En el que respecta a la distribució espacial, les emissions obtingudes amb MNEQA semblen més coherents amb la distribució de població i les activitats desenvolupades a Catalunya.